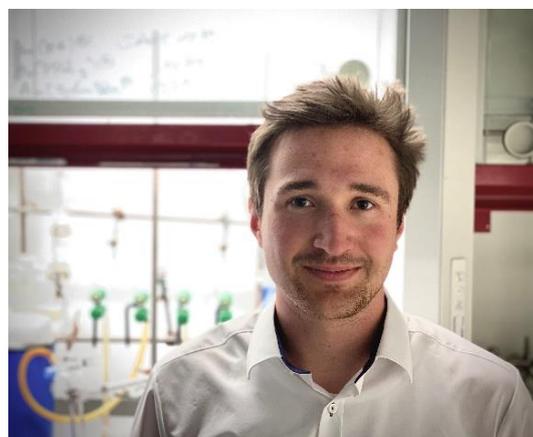
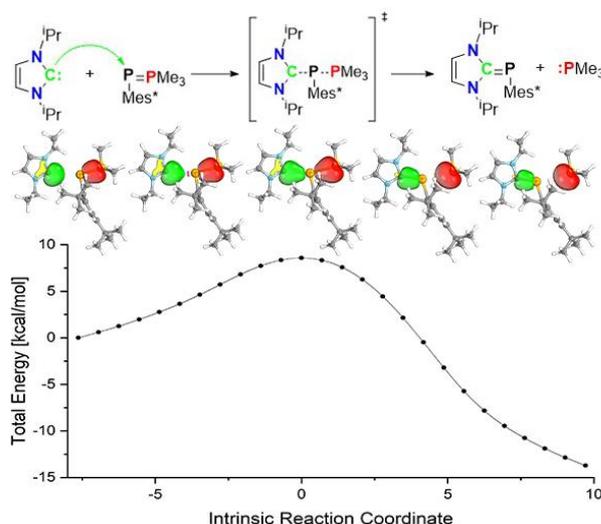


## Fakultätspreis 2020 – Jan-Erik Siewert

Masterarbeit zum Thema:

### DFT-Untersuchungen zum Mechanismus der Reaktionen von Phospha-Wittig-Reagenzien mit N-Heterozyklischen Carbenen und N-Heterozyklischen Olefinen



In der Chemie ist das Verständnis von Reaktionen von großer Bedeutung. Dazu wird mit verschiedensten Methoden der Mechanismus einer Reaktion erforscht. Durch den Einsatz von quantenchemischen Methoden untersuchte ich den Reaktionsmechanismus der Umsetzung von Phospha-Wittig-Reagenzien mit N-heterozyklischen Carbenen (NHCs) und N-heterozyklischen Olefinen (NHOs) und konnte so zum Verständnis dieser Reaktionen beitragen. Mit Hilfe von Dichte Funktional Theorie (DFT) Rechnungen zeigte ich, dass Phospha-Wittig Reagenzien ArPPMe<sub>3</sub> mit NHCs und NHOs in einem S<sub>N</sub>2-artigen Mechanismus zu neuartigen NHC Phosphiniden-Addukten (Abbildung), oder P-substituierten NHOs in einer selektiven C-H-Aktivierungsreaktion reagieren.

Ein Preprint der dazugehörigen Publikation kann unter folgendem Link abgerufen werden:

Gupta, Priyanka; Siewert, Jan-Erik; Wellnitz, Tim; Fischer, Malte; Baumann, Wolfgang; Beweries, Torsten; et al. (2020): *Phospha-Wittig Reagents Rediscovered*. ChemRxiv. Preprint.  
<https://doi.org/10.26434/chemrxiv.13296311.v1>